

**СЕТЕВАЯ БАЗА ДАННЫХ ПО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ
ОРГАНИЧЕСКИХ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ.
ПРОЕКТ № 171**

Координаторы: д-р физ.-мат. наук Станкус С. В., д-р физ.-мат. наук Гельчинский Б. Р.
Исполнители: ИТ, ИНХ СО РАН, ИМЕТ, ИТ УРО РАН

Данные о свойствах веществ в различных агрегатных состояниях и фазовых равновесиях, по-видимому, являются наиболее востребованной информацией для самого широкого круга научных и инженерных сотрудников, работающих в естественно-научных областях. Имеющийся в литературе оригинальный материал по этим вопросам разбросан по огромному числу периодических изданий, многие из которых недоступны по причине их отсутствия в библиотеках города, региона и даже страны. Справочный материал зачастую также мало доступен, не отражает результатов последних исследований и не включает новые материалы. Научные базы данных содержат информацию о свойствах изучаемых объектов и либо являются чисто фактографическими, либо содержат еще библиографическую и текстовую информацию. Большая часть баз данных, особенно в нашей стране, являются локализованными в лабораториях и научных центрах. За рубежом, в связи с развитием сетевых технологий, в последние десять—пятнадцать лет стали создаваться национальные и международные службы научных баз данных. Однако, как правило, эти базы данных недоступны для внешних пользователей. Разрабатываемая в данном проекте сетевая база данных по диаграммам состояния бинарных систем и физико-химическим свойствам веществ и материалов не имеет аналогов в России. Из зарубежных баз данных такого типа известны только коммерческие.

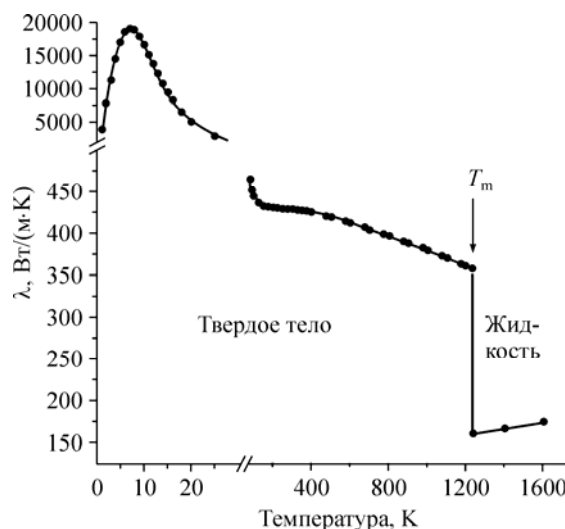
В ходе выполнения проекта создан действующий вариант сетевой базы данных по физико-химическим свойствам веществ и материалов (<http://db.itp.nsc.ru>, <http://metalldb.susu.ac.ru>), разработан двухуровневый интерфейс пользо-

вателя, обращающегося к БД через Web-браузер. Интерфейс отражает различные подходы к формированию запросов в зависимости от квалификации пользователя: от примитивных (с помощью ссылок на HTML-документы) до развернутых. Обоснован выбор форм хранения данных. На данный момент БД поддерживает три типа хранимых данных: кластер, текст и таблица. Кластер определяет систему, состоящую из нескольких физических единиц, т. е. определяет многомерное пространство из физических единиц. Текст является универсальным типом хранения любых данных, простого текста, а также текста с графическими элементами и табличными данными. Таблица позволяет хранить в БД табличные данные. Значением ячейки таблицы могут быть любые значения, как числовые, так и текстовые. Максимальное количество столбцов — 256, количество строк не ограничено.

Определены основные принципы проведения экспертной оценки, и проведен экспертный отбор опытных данных по термическим, калорическим, переносным и поверхностным свойствам 50...80 чистых элементов, по семи фазовым диаграммам бинарных систем. Работа по проведению экспертной оценки и согласованию свойств и фазовых диаграмм, а также подготовка электронных документов для ввода в базу данных являются наиболее трудоемкой частью данного проекта (см. рисунок). Под согласованием здесь понимается процедура выбора таких решений, которые бы строго удовлетворяли математическим выражениям законов физики и статистически наилучшим образом описывали имеющиеся экспериментальные данные. Эта сложная и трудоемкая задача, требующая высочайшей квалификации

исследователя, в настоящее время еще далека от своего завершения.

Исследовательские группы, принимающие участие в данном проекте, имели возможность проводить и экспериментальные исследования. Необходимость в них обуславливалась, прежде всего, отсутствием информации или возникновением неразрешимых противоречий между существующими данными по свойствам материалов, а также необходимостью построения обобщающих зависимостей для предсказания свойств. Выполнены комплексные исследования термодинамических и переносных свойств двух озонобезопасных фреонов R-236ea и C10M1, а также термических свойств и фазовых равновесий в системе Pb—Mg. Предложен новый метод оценки теплопроводности фторированных соединений пропана в жидком состоянии, а также определены пределы применимости уравнения Ли—Кеслера для смесевых фреонов.



Температурная зависимость коэффициента теплопроводности серебра в твердом и жидком состояниях (T_m — температура плавления).

Temperature dependence of argenti thermal conductivity in the solid and fluid states (T_m — melt temperature).

Основные публикации

1. *Gelchinski B. R., Les'kiv S. S., Shunyaev K. Y. et al.* The data base and information system on properties of metals and alloys// Proceedings the Third International Conference on Mathematical Modeling and Computer Simulation of Materials Technologies (MMT-2004). Ariel, Israel, September 06—10, 2004. P. 48—52.
2. *Станкус С. В., Хайрулин Р. А., Тягельский П. В.* Термические свойства и кристаллизация эвтектики в системе свинец—магний// Теплофизика и аэромеханика. 2004. Т. 11, № 1. С. 153—159.
3. *Багинский А. В., Станкус С. В., Кошелева А. С.* Теплоемкость фреона R-236ea в жидком состоянии// Там же. 2004. Т. 11, № 4. С. 647—650.
4. *Комаров С. Г., Станкус С. В.* Давление паров и P — V — T -свойства озонобезопасного хладагента C10M1// Там же. 2005. № 3. С. 459—464.